



TITLE:

14. Effects of Discreteness in a Model of Polyacetylene

AUTHOR(S):

栗田, 晴彦

CITATION:

栗田, 晴彦. 14. Effects of Discreteness in a Model of Polyacetylene. 物性研究 1987, 48(4): 460-461

ISSUE DATE:

1987-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92562>

RIGHT:

エ信号強度の変化は表面構造による違いが余りみられず、主にバルクの構造を反映した結果のようであった。しかし視射角を $2 \sim 3^\circ$ と小さな角度にし、イオンの運動エネルギーの表面に垂直な方向の成分を数 10 eV として測定すると表面構造の違いを顕著に反映したイオン入射方位角依存性がみられるようになった(図3)。c(4×12)-Al 構造では

[100], [110] にディップがあるだけであるが、2×1 構造の測定結果では [100], [110] の他に、[100] から約 18° , $11 \sim 12^\circ$ のところにもディップがあり、これらは [310], [510] 方向の表面のチャネリングと解釈される。c(4×12) 構造は、単位メッシュが理想表面の 24 倍と大きいが、その中で多様なサイトに Al が吸着しているために顕著なチャネリングディップが現れないと考えられる。

また、Si(111) の 7×7 清浄表面、Ⅲ族(Al, Ga, In) 及び Sn をおよそ $1/3$ 原子層蒸着したときに形成される $\sqrt{3}$ 構造についても同様の実験を行ったが、やはり視射角を $2 \sim 3^\circ$ にすると表面構造を反映したイオン入射方位角依存性が得られ、各 $\sqrt{3}$ 構造には類似性が認められた。

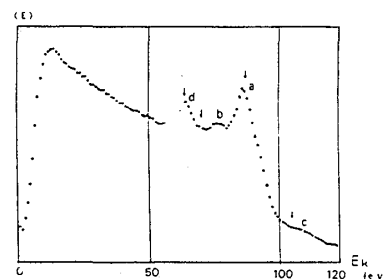


図 2

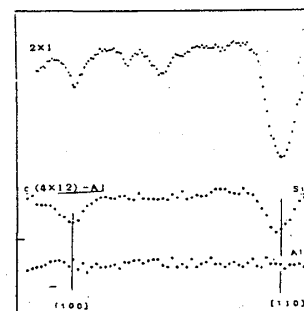


図 3

14. Effects of Discreteness in a Model of Polyacetylene

栗 田 晴 彦

最近、低次元系での非線形の励起現象(ソリトン)が注目を浴びてきておりその方向で実験、理論の研究が進んでいる。数学的モデルとしては sine-gordon 系、 ϕ^4 系などがあり、現実の物質に対してはポリアセチレン等が研究の対象である。トランスポリアセチレン $(CH)_x$ は二重に縮退した基底状態を結ぶキンク(ソリトン)が存在すると考えられており、その証拠が実験からも見つかっている。この論文では、トランスポリアセチレンに対する Hückel-Type のモデル SSH モデルから出発して、連続化極限をして TLM モデルに移行する過程で往來無視されてきた格子変位の acoustic の成分を、摂動的に考えてみた。その結果、acoustic な成分に対する解析的表式が求まったほか、それに関連してバンドの底に局在状態が出来ている事

が分かった。acoustic phonon はソリトンの拡散に大きな影響を持つと考えられており、その解明が今後の課題である。

15. Electron Correlations in Polyacetylene

米 満 賢 治

擬一次元系物質が示す性質は非常に多様である。その性質は、少数の重要なパラメーター即ち電子のバンド巾、電子・格子相互作用、電子間相互作用などの競合や協力によって説明される。一次元系物質では低温でパイエルス転移がおり、基底状態が縮退していればキンク的な励起（ソリトン）が生じる。ポリアセチレンにおけるソリトンは、初め SSH モデルなどで、電子・格子相互作用のみを考えた一体問題の範囲内で研究されてきた。しかし、現実には電子相関が無視できないことも、ENDOR や光吸収などの実験でわかってきた。赤外吸収やラマン散乱の実験で、ソリトンまわりの振動モードが観測されていて、ソリトンの性質について重要な情報を与えている。これらの振動モードに対する電子相関の効果を Hartree-Fock 近似で調べた。大まかに言って、同サイト間の斥力と隣接サイト間の斥力は振動モードに対しても逆方向に作用する。荷電ソリトンの振動モードとスピンソリトンのそれは電子間相互作用に対して逆方向に変化する。ソリトンなどの結合交替欠陥付近ではよくないと考えられるこの近似を越えるため、さらに2次までの摂動計算も静的解とともに行った。電子相関が弱いところでは HF 近似は定性的によく、ゆらぎを無視したため相関を過大評価していることが示された。

16. Revisit to 2D Ising Models with Frustration and with Arbitrary Boundary Conditions

知 久 哲 彦

有限系の2次元イジングモデルを周期的境界条件のもとで、厳密にとり扱った。すなわち、

- ① 周期的境界条件のもとでの分配関数における境界の効果を正確にとり入れた。
- ② 周期的境界条件を拡張し、その一般化条件のもとで分配関数を厳密に計算し、熱力学的極